

表 II.4 EPI Suite を用いた各同族体の物理化学的特性の推定値¹⁾

AE 同族体	モル質量 [g/mol]	log K _{ow}	沸点 [°C]	融点 [°C]	蒸気圧 [Pa]	水溶解度 [mg/L]	ヘンリー 則定数 [atm·m ³ /mol]	生分解性: 分解を受ける 確率	OH ラジカル 半減期 [日]	土壌吸着 係数 K _{oc} [L/kg]	生物濃縮 係数 log BCF
C12E01	230.4	4.50	318.2	64.8	2.36E-03	14.19	9.45E-07	0.83	0.31	112	1.76
C12E02	274.5	4.22	355.6	98.1	9.40E-05	13.86	1.47E-08	0.80	0.22	38.1	1.55
C12E03	318.5	3.95	390.8	130.8	4.00E-06	13.18	2.28E-10	0.77	0.17	13	2.34
C12E04	362.6	3.67	426.1	154.0	2.027E-07	12.30	3.55E-12	0.74	0.14	10	2.13
C12E05	406.6	3.40	461.4	175.9	1.01E-08	11.31	5.51E-14	0.71	0.12	10	1.92
C12E06	450.7	3.12	496.6	197.3	4.84E-10	10.27	8.56E-16	0.68	0.10	10	1.71
C12E07	494.7	2.85	531.9	222.7	2.00E-11	9.24	1.33E-17	0.65	0.09	10	1.49
C12E08	538.8	2.57	567.1	244.0	8.92E-13	8.25	2.07E-19	0.62	0.08	10	1.28
C12E09	582.8	2.30	602.4	260.4	4.39E-14	7.32	3.21E-21	0.59	0.07	10	1.07
C12E10	626.9	2.03	637.7	276.9	2.09E-15	6.45	4.99E-23	0.56	0.07	43.7	0.86
C12E11	670.9	1.75	672.9	293.4	9.67E-17	5.66	7.76E-25	0.52	0.06	274	0.65
C12E12	715.0	1.48	708.2	309.8	4.35E-18	4.94	1.21E-26	0.49	0.06	1.72E+03	0.44
C12E13	759.0	1.20	743.4	326.3	1.91E-19	4.30	1.87E-28	0.46	0.05	1.08E+04	0.23
C12E14	803.1	0.93	778.7	342.8	8.16E-21	3.73	2.91E-30	0.43	0.05	6.77E+04	0.50
C12E15	847.1	0.65	814.0	349.8	4.52E-22	3.22	4.53E-32	0.40	0.05	4.25E+05	0.50
C13E01	244.4	4.99	331.3	74.2	8.13E-04	4.53	1.25E-06	0.84	0.30	206	2.14
C13E02	288.5	4.71	367.2	107.1	3.49E-05	4.38	1.95E-08	0.81	0.22	70.3	1.93
C13E03	332.5	4.44	402.4	139.8	1.45E-06	4.14	3.03E-10	0.78	0.17	24	1.72
C13E04	376.6	4.16	437.7	162.3	7.36E-08	3.85	4.71E-12	0.75	0.14	10	1.51
C13E05	420.6	3.89	473.0	183.8	3.64E-09	3.52	7.31E-14	0.72	0.12	10	2.29
C13E06	464.7	3.61	508.2	205.0	1.73E-10	3.19	1.14E-15	0.69	0.10	10	2.08
C13E07	508.7	3.34	543.5	230.4	7.08E-12	2.86	1.77E-17	0.66	0.09	10	1.87
C13E08	552.8	3.07	578.7	249.4	3.32E-13	2.55	2.74E-19	0.62	0.08	10	1.66
C13E09	596.9	2.79	614.0	265.9	1.61E-14	2.25	4.27E-21	0.59	0.07	12.8	1.45
C13E10	640.9	2.52	649.3	282.3	7.61E-16	1.98	6.63E-23	0.56	0.07	80.5	1.24
C13E11	685.0	2.24	684.5	298.8	3.49E-17	1.74	1.03E-24	0.53	0.06	505	1.03
C13E12	729.0	1.97	719.8	315.3	1.56E-18	1.52	1.60E-26	0.50	0.06	3.17E+03	0.82
C13E13	773.1	1.69	755.1	331.7	6.77E-20	1.32	2.49E-28	0.47	0.05	1.99E+04	0.60
C13E14	817.1	1.42	790.3	348.2	2.88E-21	1.14	3.87E-30	0.44	0.05	1.25E+05	0.39
C13E15	861.2	1.14	825.6	349.8	1.87E-22	0.99	6.01E-32	0.41	0.05	7.83E+05	0.18
C14E01	258.5	5.48	343.4	83.4	8.13E-04	1.44	1.66E-06	0.85	0.28	380	2.52
C14E02	302.5	5.20	378.8	116.1	3.49E-05	1.38	2.59E-08	0.82	0.21	130	2.31
C14E03	346.6	4.93	414.0	141.9	1.45E-06	1.30	4.02E-10	0.79	0.16	44.3	2.10
C14E04	390.6	4.65	449.3	170.6	7.36E-08	1.20	6.25E-12	0.76	0.13	15.1	1.88
C14E05	434.7	4.38	484.6	187.2	3.64E-09	1.10	9.71E-14	0.72	0.11	10	1.67
C14E06	478.7	4.11	519.8	212.7	1.73E-10	0.99	1.51E-15	0.69	0.10	10	1.46
C14E07	522.8	3.83	555.1	238.1	7.08E-12	0.88	2.34E-17	0.66	0.09	10	2.25
C14E08	566.8	3.56	590.3	254.8	3.32E-13	0.79	3.64E-19	0.63	0.08	10	2.04
C14E09	610.9	3.28	625.6	271.3	1.61E-14	0.69	5.66E-21	0.60	0.07	23.7	1.83
C14E10	654.9	3.01	660.9	287.7	7.61E-16	0.61	8.80E-23	0.57	0.07	149	1.62

表 II.4 EPI Suite を用いた各同族体の物理化学的特性の推定値 (続き) ¹⁾

AE 同族体	モル質量 [g/mol]	log K _{ow}	沸点 [°C]	融点 [°C]	蒸気圧 [Pa]	水溶解度 [mg/L]	ヘンリー 則定数 [atm·m ³ /mol]	生分解性: 分解を受ける 確率	OH ラジカル 半減期 [日]	土壌吸着 係数 K _{oc} [L/kg]	生物濃縮 係数 log BCF
C14EO11	699.0	2.73	696.1	304.2	3.49E-17	0.53	1.37E-24	0.54	0.06	932	1.40
C14EO12	743.0	2.46	731.4	320.7	1.56E-18	0.47	2.13E-26	0.51	0.06	5.85E+03	1.19
C14EO13	787.1	2.18	766.7	337.2	6.77E-20	0.40	3.30E-28	0.48	0.05	3.67E+04	0.98
C14EO14	831.2	1.91	801.9	349.8	2.88E-21	0.35	5.13E-30	0.45	0.05	2.30E+05	0.77
C14EO15	875.2	1.64	837.2	349.8	1.87E-22	0.30	7.98E-32	0.42	0.05	1.44E+06	0.56
C15EO1	272.5	5.97	355.1	92.5	1.11E-04	0.46	2.21E-06	0.86	0.27	701	2.90
C15EO2	316.5	5.69	390.4	125.1	4.75E-06	0.44	3.43E-08	0.82	0.20	239	2.68
C15EO3	360.6	5.42	425.6	150.2	2.31E-07	0.41	5.34E-10	0.79	0.16	81.7	2.47
C15EO4	404.6	5.15	460.9	178.8	9.60E-09	0.37	8.29E-12	0.76	0.13	27.9	2.26
C15EO5	448.7	4.87	496.2	194.9	5.33E-10	0.34	1.29E-13	0.73	0.11	10	2.05
C15EO6	492.7	4.60	531.4	220.3	2.21E-11	0.31	2.00E-15	0.70	0.10	10	1.84
C15EO7	536.8	4.32	566.7	243.8	9.27E-13	0.27	3.11E-17	0.67	0.09	10	1.63
C15EO8	580.9	4.05	602.0	260.2	4.56E-14	0.24	4.84E-19	0.64	0.08	10	1.42
C15EO9	624.9	3.77	637.2	276.7	2.17E-15	0.21	7.52E-21	0.61	0.07	43.7	2.21
C15EO10	669.0	3.50	672.5	293.2	1.01E-16	0.19	1.17E-22	0.58	0.07	274	1.99
C15EO11	713.0	3.22	707.7	309.6	4.52E-18	0.16	1.82E-24	0.55	0.06	1.72E+03	1.78
C15EO12	757.1	2.95	743.0	326.1	1.99E-19	0.14	2.82E-26	0.52	0.06	1.08E+04	1.57
C15EO13	801.1	2.68	778.3	342.6	8.49E-21	0.12	4.38E-28	0.49	0.05	6.77E+04	1.36
C15EO14	845.2	2.40	813.5	349.8	4.68E-22	0.11	6.81E-30	0.46	0.05	4.25E+05	1.15
C15EO15	889.2	2.13	848.8	349.8	3.15E-23	0.09	1.06E-31	0.42	0.05	2.66E+06	0.94
最大値	889.2	5.97	848.8	349.8	0.0023598	14.19	0.00000221	0.86	0.31	2660000	2.90
最小値	230.4	0.65	318.2	64.8	3.15E-23	0.09	4.53E-32	0.40	0.05	10	0.18
50%値	559.8	3.31	584.5	252.1	3.32E-13	1.31	3.19E-19	0.63	0.08	75.4	1.63

¹⁾ 本詳細リスク評価書では、「各同族体は明らかに異なる物性値を有し、同族体別のリスク評価が必要」という論旨を補強するために、この推定結果を示した。これらの推定物性値の一部は、評価書の第IV章3.3.1項においてのみ参考データとして用いているが、実際のリスク推算には採用していない。